

# О ВОЗМОЖНОСТИ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ПОРЫ ЧЕРЕЗ ЗЕРНОГРАНИЧНУЮ ОБЛАСТЬ

*Маркидонов А.В.<sup>1</sup>, Павловская Е.П.<sup>2</sup>*

*Руководитель – профессор, д.ф.-м.н., Старостенков М.Д.*

<sup>1</sup> Филиал Кузбасского государственного технического университета в г.  
Новокузнецке, г. Новокузнецк

<sup>2</sup> Кузбасская государственная педагогическая академия, Новокузнецк  
markidonov\_artem@mail.ru

Материалы, из которых изготавливаются различные конструкционные узлы, как правило, являются поликристаллами, состоящими из отдельных зерен. Границы зерен играют немаловажную роль при рассмотрении различных радиационно-стимулированных явлений.

При изучении эволюции дефектных структур в материале, подверженному радиационному облучению, необходимо учитывать немаловажный фактор – возможность образования ударных послекаскадных волн [1]. Развитие каскада атомных столкновений до момента, при котором устанавливается максвелловское распределение сталкивающихся частиц по скоростям, происходит за время порядка  $10^{-12}$  с, тогда как для равномерного рассеяния энергии по объему каскада волнами в решетке необходимо время  $10^{-11}$  с [2]. В результате резкого расширения сильно разогретой каскадной области может возникнуть ударная волна.

Цель данной работы – определить влияние ударных послекаскадных волн на процессы структурных изменений вакансионных пор в поликристалле.

Рассматриваемые в работе явления отличает малый размер исследуемых областей, что затрудняет прямые наблюдения. Поэтому наиболее рациональным видится использование методов компьютерного моделирования. В качестве метода компьютерного моделирования был выбран метод молекулярной динамики. Исследование проводилось с помощью пакета XMD [3]. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома [4]. Шаг интегрирования равнялся 5 фс.

В работе рассматривались симметричные границы зерен наклона. Для их создания кристаллит разбивался на два равных зерна, каждое из которых поворачивалось относительно кристаллографического направления  $\langle 111 \rangle$ . Ось поворота проходила через узел решетки, расположенный в центре зерна. Для того чтобы получить угол разориентировки  $\theta$  одно из зерен поворачивалось на угол  $\theta/2$ , а второе – на угол  $-\theta/2$ . Затем в межзеренной области удалялись атомы таким образом,

чтобы границы зерен были параллельны друг другу, после чего оба зерна сближались на расстояние, соответствующее расстоянию между узлами решетки в направлении  $X$  расчетной ячейки. После таких манипуляций некоторые атомы могли располагаться на критически близком расстоянии, поэтому до проведения структурной релаксации из расчетной ячейки удалялись атомы, для которых расстояние до ближайших соседей меньше минимального в моделируемой кристаллической структуре.

Волны создавались путем присвоения атомам, расположенным на границе расчетной ячейки, скорости вдоль направления  $X$ .

После выполнения заданного количества шагов компьютерного эксперимента следовала структурная релаксация системы при 0 К.

Рассмотрим пору, расположенную в одном из зерен. В проводимых экспериментах пора оставалась стабильной и диффузионного дрейфа отдельных вакансий на границу зерен не наблюдалось. В работе [5] также отмечено, что вакансии по сравнению с межузельными атомами относительно слабо взаимодействуют с границами. Дрейф вакансий наблюдается при температурах близких к температурам плавления, когда пора начинает интенсивно испарять вакансии.

Отметим, что граница зерен не является препятствием для волн. Так, например, в работе [6] показано, что при пересечении границы зерен специального типа  $\Sigma 7$  только около 20% энергии уединенной волны рассеивается в зернограницной области.

Результаты эксперимента с расчетным блоком, имеющим угол разориентации зерен  $4^\circ$ , представлены на рис. 1.

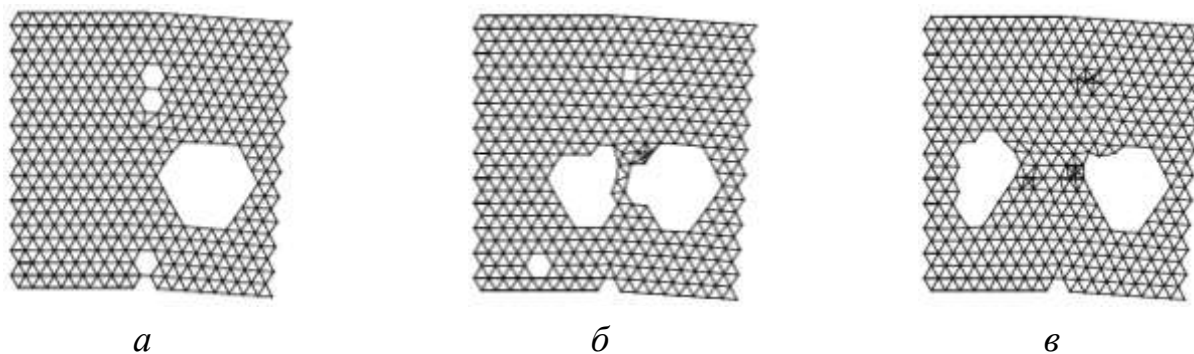


Рис. 1. Фрагмент плоскости  $\{111\}$  расчетного блока с порой, расположенной в одном из зерен в начале эксперимента (а), а также после прохождения пяти (б) и девяти (в) ударных волн со скоростью 7000 м/с. Волны распространяются слева направо относительно рисунка

Как следует из рисунка 1, под воздействием ударных волн от поры отщепляется группа вакансий, которая может быть перенесена через границу зерен.

Проведенное исследование показало, что ударные послекасадные

волн могут вызывать дробление вакансионной поры на отдельные составляющие при расположении ее в зернограничной области. Во многом проявление этого эффекта зависит от взаимного расположения поры и зернограничных дислокаций. Также показана возможность сквозного перемещения вакансионных скоплений через границу зерен наклона.

Известно, что растворение поры может осуществляться за счет повакансионного испарения или же за счет диффузионного течения материала вглубь поры. Описанный в настоящей работе процесс уменьшения размеров поры под воздействием ударных волн не укладывается в рамки данных механизмов. Поэтому будем называть его динамическим растворением, так как он инициируется высокоскоростными кооперативными атомными смещениями.

Развиваемые положения могут найти свое применение, как в радиационном материаловедении, так и при прогнозировании поведения материалов, эксплуатируемых в экстремальных условиях. В частности, известно, что основные пути снижения радиационного распухания конструкционных материалов заключаются в изменении структурного состояния материалов легированием, механической и термической обработками. Возможно, что данная работа может способствовать разработке новой методики борьбы с распуханием.

### Список литературы

1. Овчинников В.В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // Успехи физических наук. 2008. Т.178. №9. С.991-1001.
2. Штремель М.А. Прочность сплавов. Часть I. Дефекты решетки. – Москва: МИСИС, 1999. – 384 с.
3. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics // [Electronic resource]. Mode of access : <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.
4. Johnson R.A. Analytic nearest-neighbor model for fcc metals // Physical Review B. 1988. V.37. №8. P.3924-3931.
5. Синяев Д.В. Исследование механизмов структурно-энергетических превращений вблизи границ зерен наклона в интерметаллиде  $\text{Ni}_3\text{Al}$ . Автореферат диссертации на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук. – Барнаул, 2008. – 21 с.
6. Псахье С.Г., Зольников К.П., Кадыров Р.И., Руденский Г.Е., Шаркеев Ю.П., Кузнецов В.М. О возможности формирования солитообразных импульсов при ионной имплантации // Письма в ЖТФ. 1999. Т.25. В.6. С.7-12.